統計力学AⅢ

2020/10/20

統計力学とは

$H(\Gamma)$

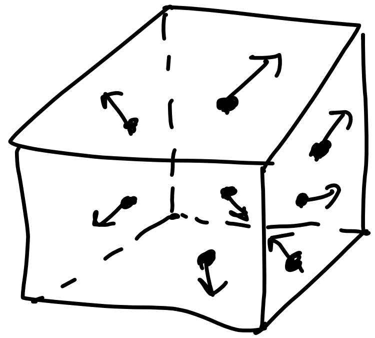
つなぐ

$S(U,V)$

- 力学状態 $\Gamma = (r_1, \dots r_N, p_1 \dots p_N) \in \mathbb{R}^{6N}$
- ハミルトニアン $H(\Gamma)$

  $[H(\Gamma;L)]$ ← パラメータ依存性
- エネルギー面 $H(\Gamma)=E$

???



- 熱力学状態 (U,V)
- エントロピー $S(U,V)$

統計力学の道具

▷ 巨大な数を扱う"例"

$$p(m) = e^{-N\underset{\sim}{I(m)} + o(N)}$$

事件は指数の肩で生じる

▷ 力学に確率を導入する"例"

$$\rho(x, p) = \frac{\delta(H(x,p) - E)}{\Sigma(E)}$$

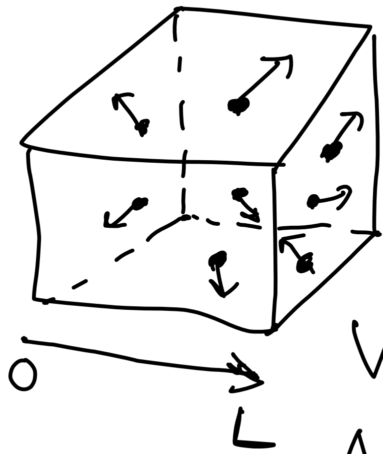
⇒ 多数の粒子の力学へ

統計力学の原理

- 力学状態 $\Gamma = (\mathbf{r}_1, \ldots \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \ldots \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N}$
- ハミルトニアン

  $H(\Gamma)$ $\left[\begin{array}{l} H(\Gamma; L) \\ H(\Gamma; V) \end{array}\right]$ パラメータ依存性
- エネルギー面

  $H(\Gamma) = E$



$V = AL$

A：断面積

$\Downarrow$

- 確率分布 $\rho(\Gamma; E, L)$

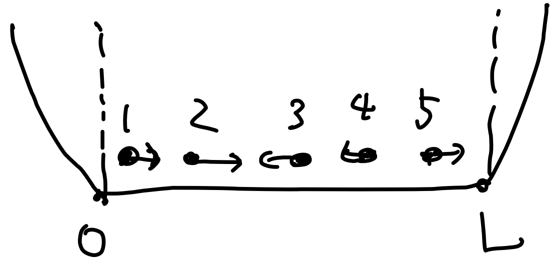
（・巨大数の扱い：次回）

圧力 $p = p(E, V)$

~ Intermission ~

例：1次元 5粒子系

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \dfrac{p_i}{m} \\ \dot{p}_i = -\dfrac{\partial V(x_1 \ldots x_5)}{\partial x_i} \end{cases}$$



$$V(x_1, x_2, \ldots, x_5) = \sum_{i=1}^{4} \underbrace{\frac{1}{|x_{i+1}-x_i|^6}}_{\substack{\parallel \\ V_{int}(|x_{i+1}-x_i|)}} + \underbrace{\frac{1}{2} k x_1^2 \theta(-x_1) + \frac{1}{2} k (x_5 - L)^2 \theta(x_5 - L)}_{\substack{\parallel \\ V_{wall}(x_1, \ldots, x_5)}}$$

$$\Gamma = (x_1, \ldots x_5, p_1, \ldots, p_5)$$

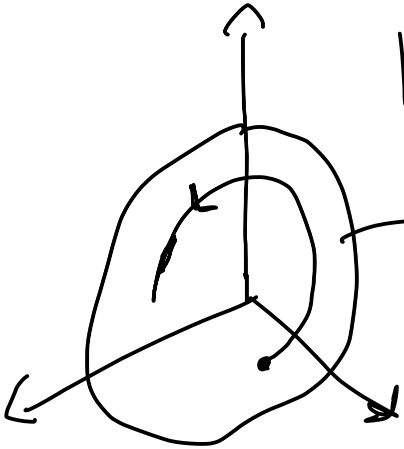
$$H(\Gamma) = \sum_{i=1}^{5} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{4} V_{int}(|x_{i+1} - x_i|) + V_{wall}(x_1, \ldots, x_5)$$

$$= \text{const in time}$$

運動

10次元空間

$\mathbb{R}^{10}$



$H(\Gamma)=E$

9次元空間

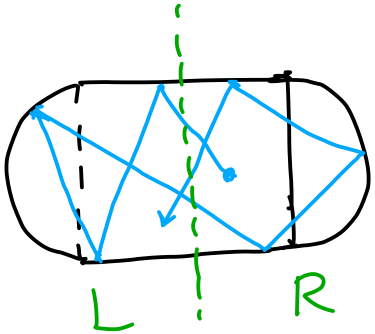
$\Gamma(t)=(x_1(t),\ \cdots,\ x_5(t),\ p_1(t),\ \cdots,\ p_5(t))$

（$\Gamma(0)$ が決まると 決まる）

- 解ける？
- 振舞は？
- 数値計算で計算する？

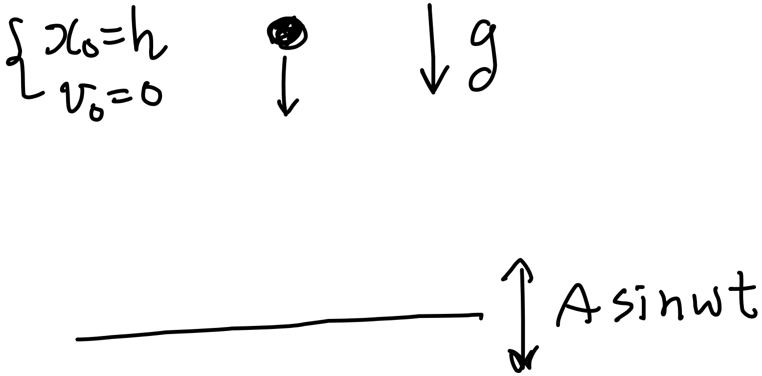
“カオス”

カオス：例



・スタジアムに閉じ込められた1粒子の軌道

L L L R R R L ------

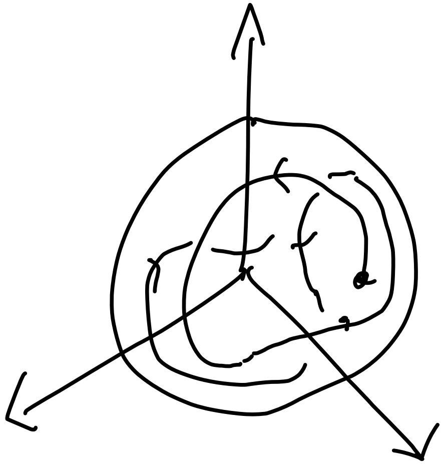


n回目に衝突する時刻 t_n

衝突直後の速度 v_n

$$(t_{n+1}, v_{n+1}) \longleftarrow (t_n, v_n)$$

(この)カオスの特徴



エネルギー面 $H(\Gamma)=E$

(9次元空間)

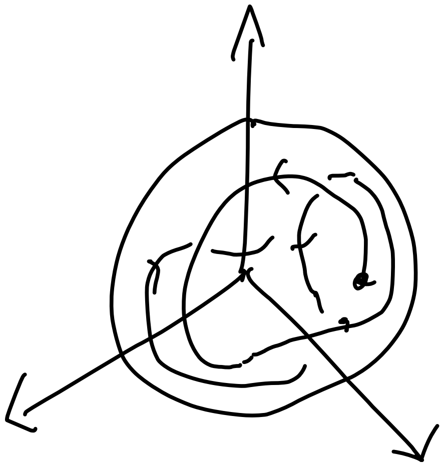
を"大体"くまなくまわる。

力学系理論

- ▷ 初期条件に依存する。
- ▷ "大体"を正確に述べる必要有
- ▷ 周期運動 ⟶ カオス

分岐は複雑

確率密度



▷ 初期条件 知らない

▷ ランダムな時刻で Γ を測定

⇓ 頻度分布

$$\rho(\Gamma;E,L) = \frac{\delta(H(\Gamma;L)-E)}{\Sigma(E,L)}$$

規格化因子

周期運動ではないが，エネルギー面内をくまなく運動するので

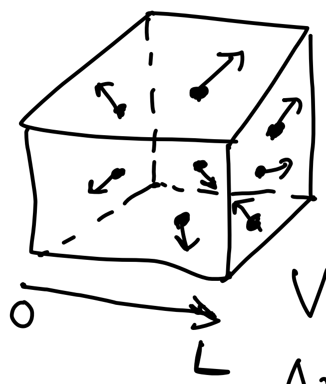
$$\int d\Gamma\, \rho(\Gamma;E,L) = 1$$

$$\Rightarrow \Sigma(E,L) = \int d\Gamma\, \delta(H(\Gamma;L)-E)$$

~ Intermission ~

等重率の原理

- 力学状態 $\Gamma = (\mathbf{r}_1, \dots \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N}$
- ハミルトニアン
  $H(\Gamma)$ $\left[\begin{array}{l} H(\Gamma;L) \\ H(\Gamma;V) \end{array}\right]$ パラメータ依存性
- エネルギー面
  $H(\Gamma)=E$



$V=AL$

A: 断面積

$$H(\Gamma;L)=\sum_{i=1}^{N} \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + \sum_{i<j} V_{int}(|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|)+\sum_{i=1}^{N} V_{wall}(\mathbf{r}_i;L)$$

十分に時間がたったあとのマクロな量は

確率密度 $\rho(\Gamma;E,L)=\dfrac{\delta(H(\Gamma;L)-E)}{\Sigma(E,L)}$

で定まる確定値で与えられる。

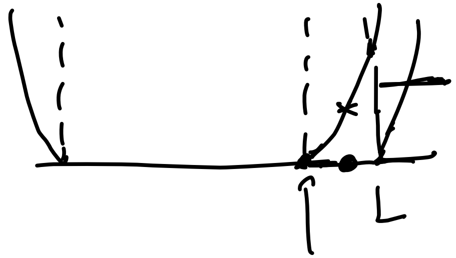
コイン

$m=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$

表・ウラ等しい

$m_*=0$

圧力の公式 I



圧力の表現：

壁の位置 $L \to L+\Delta L$

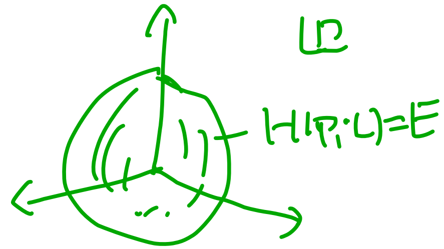
系にした仕事 $= \sum_i \left[V_{wall}(r_i; L+\Delta L) - V_{wall}(r_i; L) \right]$

$\simeq -p(\Gamma; L)\, \Delta L\, A$

$$p(\Gamma; L) = -\frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial L}\sum_i V_{wall}(r_i; L)$$

$$= -\frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial L} H(\Gamma; L)$$

圧力の公式II



等重率の原理

$$P_* = -\int d\Gamma \, \frac{\delta(H(\Gamma;L)-E)}{\Sigma(E,L)} \frac{1}{A} \frac{\partial H(\Gamma;L)}{\partial L}$$

測定値

はずれる確率

→ 0 (来固)

$$\frac{\partial}{\partial L} \theta(E-H(\Gamma;L)) = -\delta(E-H(\Gamma;L)) \frac{\partial H(\Gamma;L)}{\partial L}$$

$$= \frac{1}{\Sigma(E,L)} \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial L} \underbrace{\int d\Gamma \, \theta(E-H(\Gamma;L))}_{\Omega(E,L) = \int_{H(\Gamma;L)\le E} d\Gamma}$$

$$\Sigma(E,L) = \int d\Gamma \, \delta(E-H(\Gamma;L))$$

$$= \frac{\partial}{\partial E} \int d\Gamma \, \theta(E-H(\Gamma;L))$$

$$= \frac{\partial}{\partial E} \Omega(E,L)$$

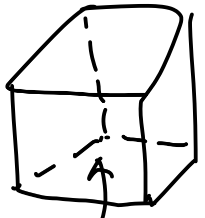
$$= \frac{\frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial L}\Omega(E,L)}{\frac{\partial}{\partial E}\Omega(E,L)} \underset{\text{変換}}{\overset{\text{変数}}{=}} \frac{\frac{\partial}{\partial V}\Omega(E,V)}{\frac{\partial}{\partial E}\Omega(E,V)}$$

$$\boxed{V = AL}$$

$$\Omega(E,V) = \int d\Gamma \, \theta(E-H(\Gamma;V))$$

$\Omega(E,V)$の計算例

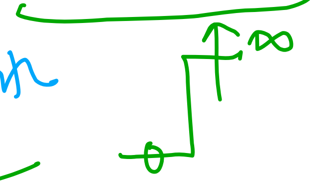
・希薄気体： 相互作用長 ξ , $\xi^3 N \ll V$



領域D

$$H(\Gamma;V) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + \cancel{\sum_{i<j} V_{int}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)} + \sum_{i=1}^{N} V_{wall}(\mathbf{r}_i)$$

相互作用する配置はまれ



閉じこめる

$\mathbf{r}_i \in D$

$$\Omega(E,V) = \int_{H(\Gamma;V)\leq E} d\Gamma$$

$$= \int_{\sum_{i=1}^{N}|\mathbf{p}_i|^2 \leq 2mE} d\mathbf{p}_1 \cdots d\mathbf{p}_N \cdot \int_{\mathbf{r}_i \in D} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N$$

$$= \frac{\pi^{3N/2}}{\left(\frac{3N}{2}\right)!} (2mE)^{\frac{3N}{2}} \cdot V^N$$

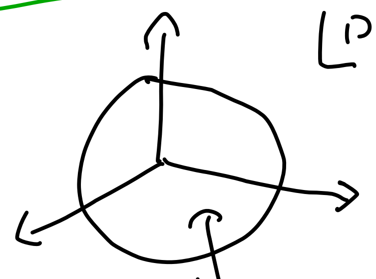
来週

指数関数の肩!!

半径rの
d次元球の体積

$$= \frac{\pi^{d/2}}{\left(\frac{d}{2}\right)!} r^d$$

(d: 偶数)



$\mathbf{p}$

$$\sum_{i=1}^{N} |\mathbf{p}_i|^2 = 2mE$$

3N次元球

圧力の計算例

$$p_* = \frac{\frac{\partial}{\partial V}\Omega(E,V)}{\frac{\partial}{\partial E}\Omega(E,V)}$$

$$\Omega(E,V) = \frac{\pi^{3N/2}}{\left(\frac{3N}{2}\right)!}(2mE)^{\frac{3N}{2}} \cdot V^N$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\partial\Omega(E,V)}{\partial V} = N\frac{\Omega(E,V)}{V}$$

$$\frac{\partial\Omega(E,V)}{\partial E} = \frac{3N}{2}\frac{\Omega(E,V)}{E}$$

$$= \frac{N\frac{\Omega(E,V)}{V}}{\frac{3N}{2}\frac{\Omega(E,V)}{E}} = \frac{2E}{3V}$$

（ベルヌーイの式）

$$\left(\begin{array}{l} E = \frac{3}{2}Nk_BT \\ \Rightarrow p_* = \frac{Nk_BT}{V} \end{array} \right)$$

～Intermission～

まとめ

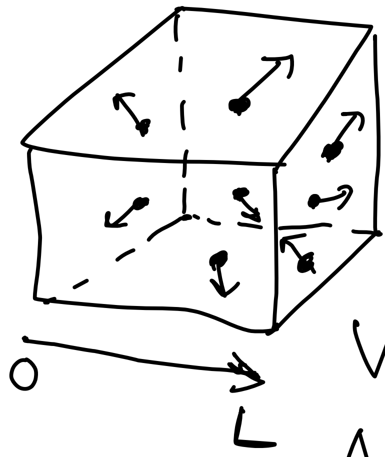
・力学状態　$\Gamma = (\mathbf{r}_1, \dots \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N}$

・ハミルトニアン　$H(\Gamma)$

$H(\Gamma;L)$　パラメータ依存性

$H(\Gamma;V)$

・エネルギー面　$H(\Gamma)=E$



$V=AL$

A:断面積

・等重率の原理　$\rho^{mc}_{E,V}(\Gamma) \equiv \dfrac{\delta(H(\Gamma;V)-E)}{\Sigma(E,V)}$

ミクロカノニカル分布

・$\Sigma(E,V)=\dfrac{\partial}{\partial E}\Omega(E,V)$

・$\Omega(E,V)=\displaystyle\int_{H(\Gamma;V)\le E} d\Gamma$

・圧力公式　$p_*(E,V) \equiv \dfrac{\frac{\partial}{\partial V}\Omega(E,V)}{\frac{\partial}{\partial E}\Omega(E,V)}$

レポート

1) 半径rのd次元球の体積を導出せよ。

2) スタジアム中の粒子の軌道を作図し，LRRL…を求めよ。

3) 振動するを板ではねかえる球の漸化式
$(t_n, v_n) \to (t_{n+1}, v_{n+1})$ を求め，数値的に解け。

4) 5粒子系の運動方程式を数値的に解いてみよ
計算機を使って解く